

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

DOCKING MOLECULAR PARA NANOTUBOS

CORNETET, Luisa Rodrigues (autora)
MACHADO, Karina dos Santos (orientadora)
cornetet.luisa@gmail.com

Evento: Congresso de Iniciação Científica
Área do conhecimento: Ciências Exatas e da Terra/ Ciência da Computação

Palavras-chave: bioinformática, docking, nanotubos

1 INTRODUÇÃO

O *docking* molecular vem crescendo cada vez mais como uma ferramenta para a descoberta de novas drogas, e tem sido aplicado em diversas circunstâncias [1]. Nesse resumo será apresentado um experimento de *docking* molecular com uma proteína-alvo e diversos nanotubos de carbono, onde serão analisadas as energias livres de ligação (FEB – *Free Energy of Binding*) resultantes do experimento.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

O *docking* molecular é uma técnica computacional utilizada para a determinação aproximada da energia de interação entre uma macromolécula receptora e um ligante. Para a realização do *docking* com o *AutodockVina* [2] é necessário que a macromolécula receptora fique fixa, enquanto o ligante pode percorrer um espaço determinado por uma caixa de simulação, tentando encontrar a melhor posição (aquela que possuir a menor FEB).

Para a execução do *docking* a macromolécula receptora utilizada foi uma estrutura de suporte de ADP/ATP mitocondrial em complexo carboxiatractilosídeo, encontrada no *Protein Data Bank (PDB)*, e diversos ligantes, que são nanotubos mitocondriais de carbono de parede única.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Para a execução do *Docking* com diversos nanotubos foi utilizado o *software AutodockVina* [2], que realiza processos de docagem molecular e triagem virtual. Para a automatização dos experimentos foi utilizado um *Framework* para triagem virtual [3] que possibilita a criação de *scripts* em *Python* que executam automaticamente várias simulações com um receptor e diversos ligantes.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

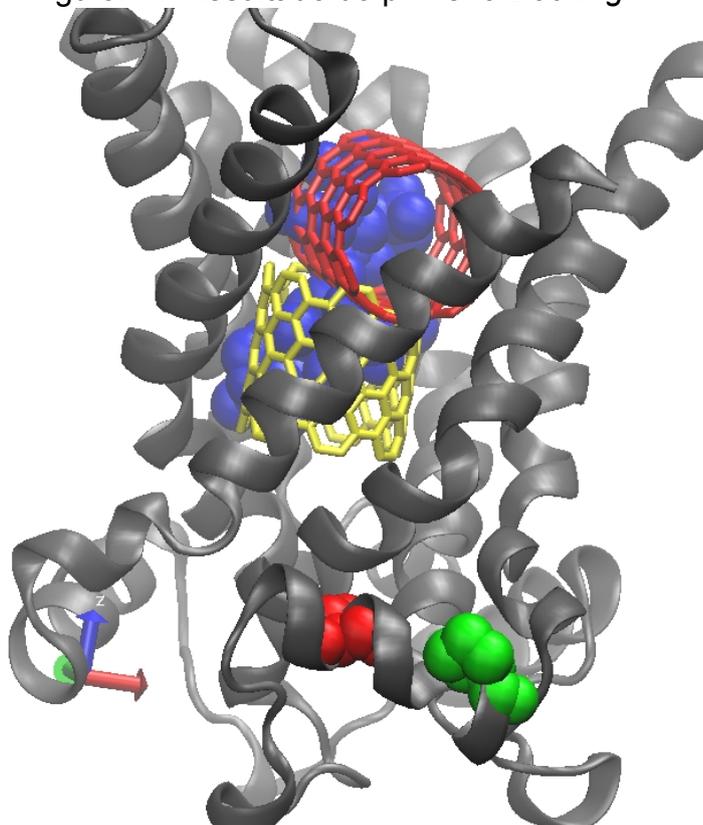
Para o início desse trabalho foi realizada a execução de um *docking* cujo resultado é apresentado na figura 1. A parte cinza da figura representa a macromolécula receptora e o nanotubo vermelho representa a posição inicial deste,

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

enquanto o nanotubo amarelo mostra a posição do nanotubo após a execução do *docking*. Para essa configuração foi obtida uma FEB de - 16.7 kcal/mol .

Figura 1 – Resultado do primeiro *Docking*



Fonte: Os autores

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Até o momento foram feitos alguns experimentos automatizados com diversos tipos de nanotubos, cujos resultados não foram apresentados nesse resumo. Como trabalhos futuros serão automatizados e analisados mais experimentos com outros tipos de nanotubos.

REFERÊNCIAS

- [1] MENG, Xuan-Yu et al. Molecular docking: a powerful approach for structure-based drug discovery. *Current computer-aided drug design*, v. 7, n. 2, p. 146, 2011.
- [2] O. Trott, A. J. Olson, AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading, *Journal of Computational Chemistry* 31 (2010) 455-461

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

[3] SEUS, Vinicius Rosa; MACHADO, Karina dos Santos. UM FRAMEWORK PARA TRIAGEM VIRTUAL.